

# 鉴定、定量、简化 全景，了然于胸

Agilent 7250 GC/Q-TOF 系统



# 准备好实现更多目标了吗？

了解您样品的组成及其含量，可助您获得对您组织而言极为重要的结论和突破。

一体式 Agilent 7250 GC/Q-TOF 系统与完善的 Agilent MassHunter 软件相结合，能够在挑战性的 GC/MS 应用中为您提供及时、可靠的分析结果。是您应对棘手的 GC/MS 鉴定、定量和探索挑战的优选仪器：

- 执行复杂的代谢组学研究
- 筛查复杂基质中的农药
- 鉴定不同基质中的化合物
- 测定化工原料中的污染物浓度

7250 GC/Q-TOF 系统专为提升实际性能、适应实验室的复杂应用而设计制造，可满足您机构的需求：提供始终如一的优异结果。



**无论是常规筛查工作，还是百年一遇的重大发现，均可充满信心、从容应对**

**7250 GC/Q-TOF 可为您带来更多：**

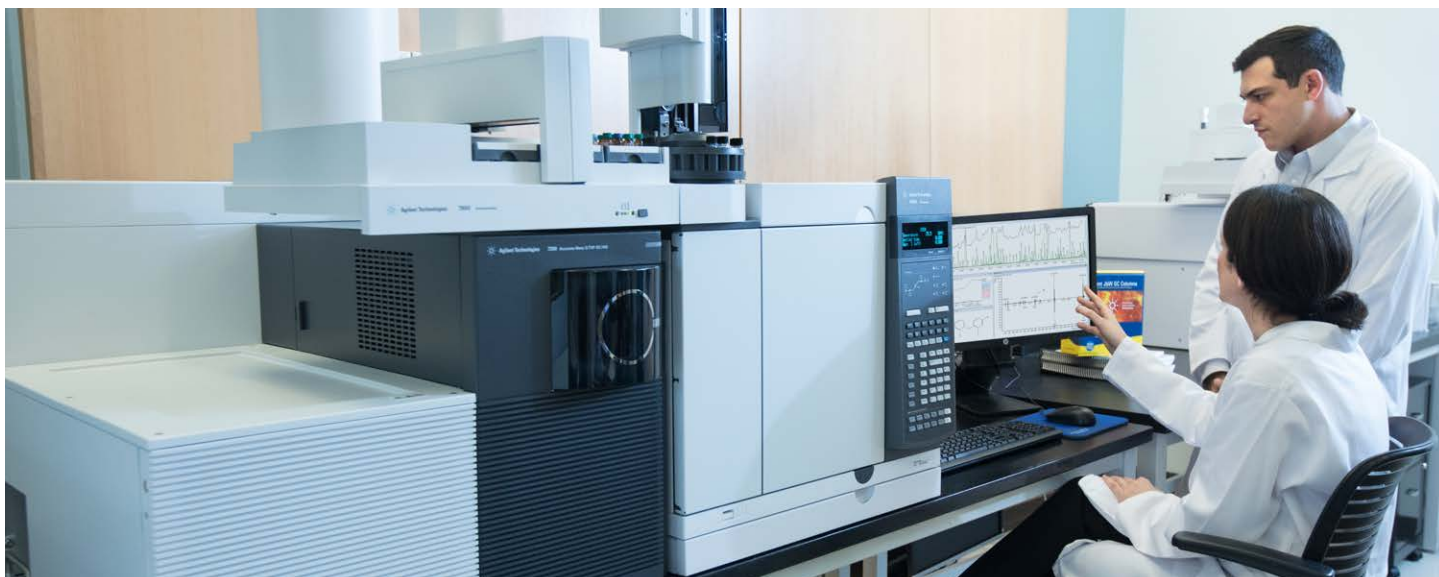
- 高灵敏度检测
- 准确定量分析
- 探索未知物的能力
- 简化的谱图
- 可重现的数据
- 动态范围

**您可以减少对以下问题的担忧：**

- 未来的法规
- 对结果的不确定
- 真正的未知物
- 数据解析时间
- 重复测定的不一致
- 假阴性和假阳性

## 不断变化的分析挑战需要新方法和新手段

40 多年来，安捷伦创新产品已帮助各类实验室满足其日益复杂的分析需求。7250 是我们非常先进的 GC/Q-TOF，专为提供优异的性能和实验室稳定性而设计制造。



## 希望实现更可靠的鉴定？

*“安捷伦仪器在我们的实验室中发挥了非常大的作用，主要原因有三点：高度可靠、准确无误、简单易用。”*

– Mike Thurman 博士

科罗拉多大学环境质谱分析中心

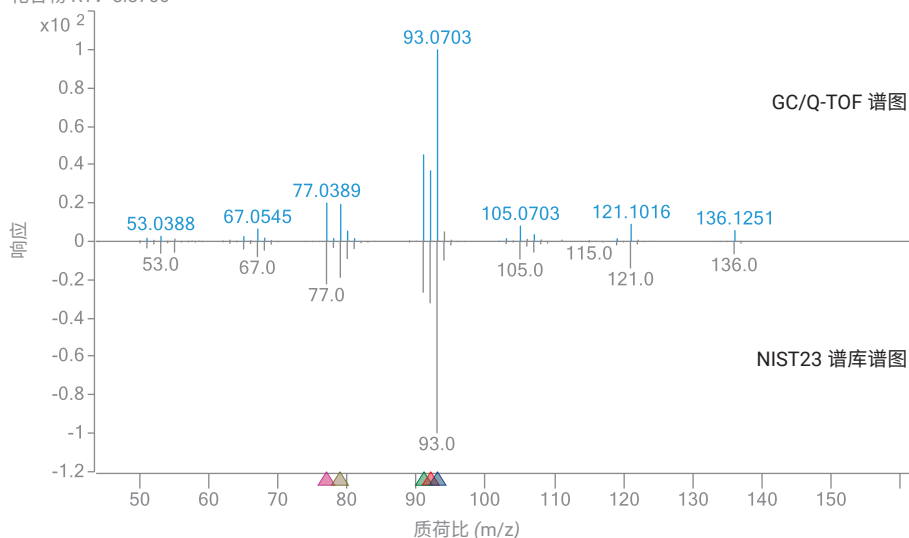
如果无法全面了解样品中的分析物，可能对您的研究、开发和质量控制工作产生严重影响。Agilent 7250 GC/Q-TOF 系统的强大分析能力结合 MassHunter 软件为您带来无可比拟的化合物鉴定能力。

- **确定化合物。** 无失真的谱库级高质量谱图，让您能结合市售谱库可靠鉴定化合物
- **确认分子式。** 出色的同位素保真度，为您提供可信用度更高的分子式鉴定
- **检测痕量分析物。** 谱内动态范围宽，即使存在高丰度共洗脱物质也能实现痕量检测
- **解析结构。** MS/MS 测量的高分辨率、精确质量离子谱图可提供结构信息，提高了选择性，消除了基质干扰效应

## 谱图保真度和精确质量数可确保谱库匹配度

您可以通过市售谱库进行谱库搜索，轻松实现化合物鉴定。7250 GC/Q-TOF 系统可提供能支持数十万种化合物谱库的谱图质量，这些谱库中的大部分谱图均由安捷伦四极杆气质联用系统生成。与谱库高度相似的 EI 碎片模式与精确质量信息相结合，使 7250 GC/Q-TOF 系统成为使用 EI 谱库进行化合物鉴定的理想平台。

化合物 RT: 8.3706



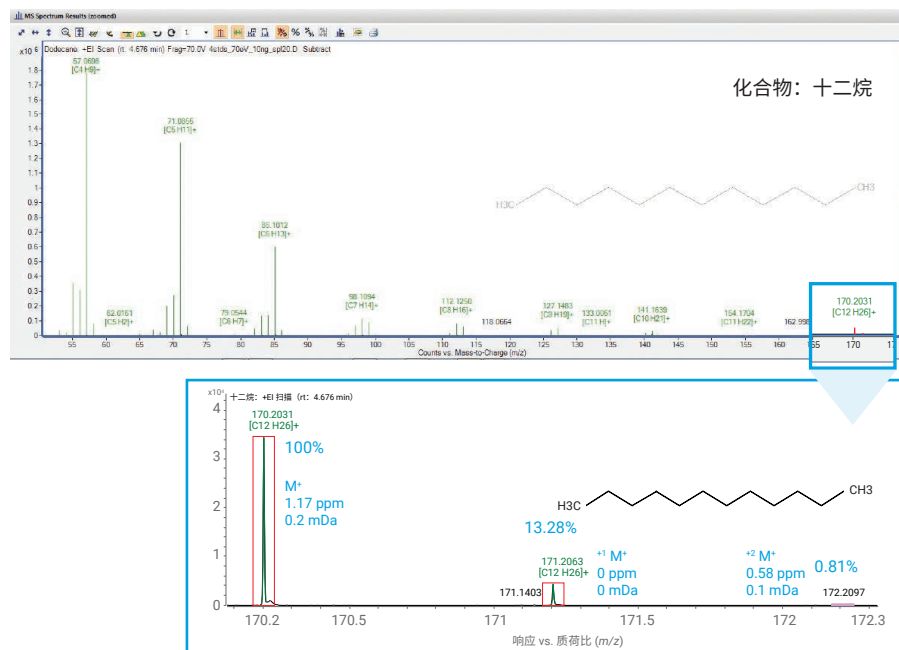
土壤中的  $\alpha$ -蒎烯。谱库匹配得分: 95.8

Components							
Component RT	Compound Name	Match Factor	Best Hit	Formula	Component RI	Library RI	Delta RI
8.3706	(1R)-2,6,6-Trimethylbicyclo[3.1.1]	95.8	<input checked="" type="checkbox"/>	C10H16	932	932	0

## 同位素保真度

可靠的化合物鉴定不仅需要优异的质量数准确度，还需要考虑同位素丰度分布匹配等独立的化合物特性。

您可以通过 MassHunter 定性分析软件轻松了解同位素保真度。它使您可以基于与精确质量数测量互补的特征实现化合物鉴定。即使对于痕量同位素，如十二烷谱图中的低丰度  $M^+$  峰簇，Agilent 7250 GC/Q-TOF 也能实现优异的同位素保真度。

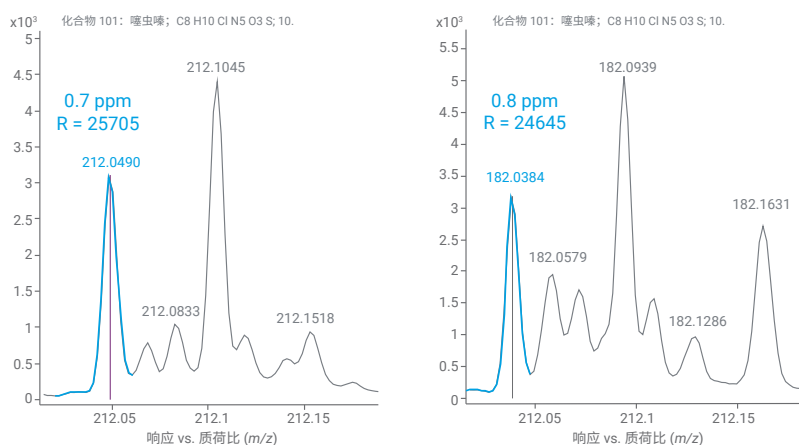


## 在农药分析中实现高分辨率和质量数准确度

分析物与干扰物的分离需要高分辨率。然而，在分析复杂基质中的痕量组分时，还必须保持其他性能特性，如宽动态范围和高灵敏度。

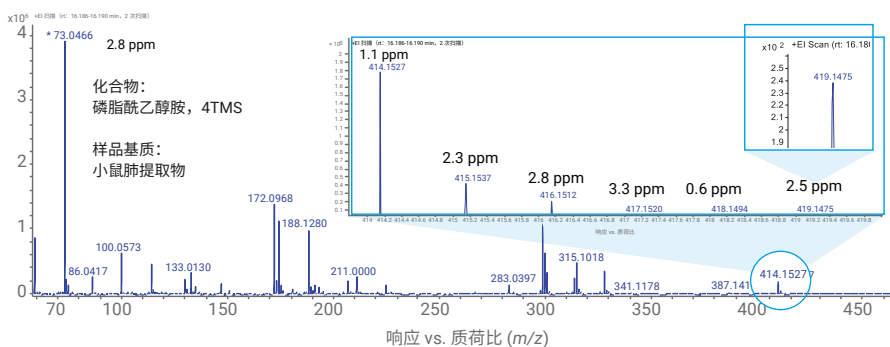
本文的示例代表此类情景：分析牛油果中浓度为 5 ppb 的杀虫剂噻虫嗪，牛油果是一种具有显著背景的复杂基质。即使在这些条件下，特征质谱峰仍与背景得到分离，且质量数准确度满足 EU SANTE/11945/2015 指南的要求。

此外，无论采集速度或质量数范围如何，均可获得同样级别的谱图性能。



## 在复杂基质中实现宽动态范围

更宽的谱内动态范围能够在存在显著背景或其他共洗脱物时，实现痕量分析物的可靠检测。7250 通常可提供四个数量级的谱内动态范围，即使对于复杂基质也是如此。此示例显示了复杂生物样品（小鼠肺提取物）中磷脂酰乙醇胺 (4TMS) 16000+:1 的谱内动态范围。

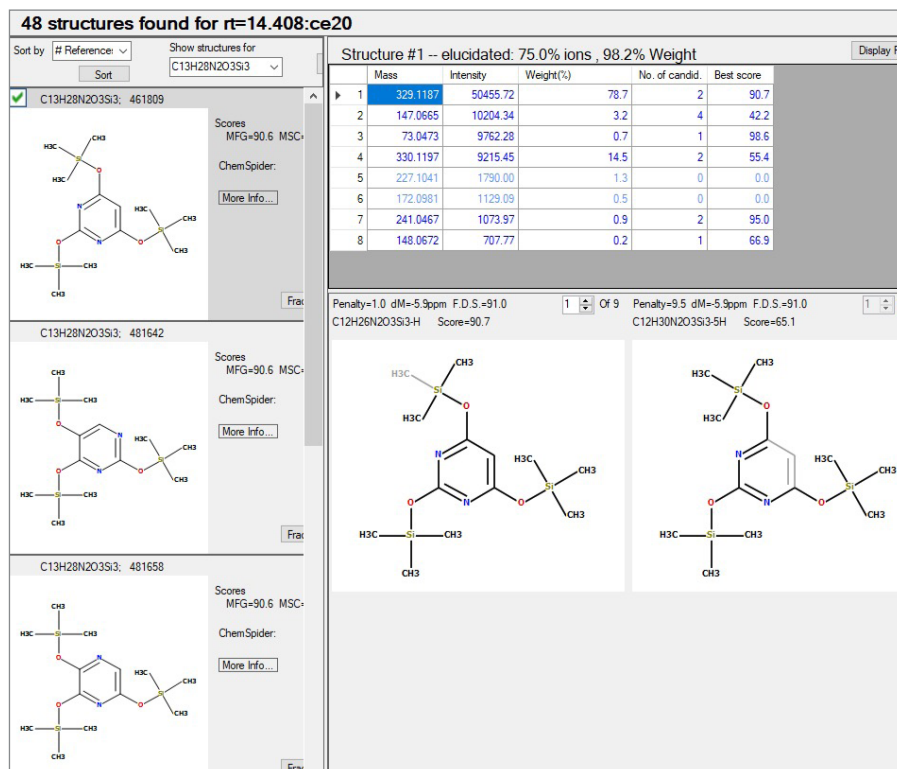
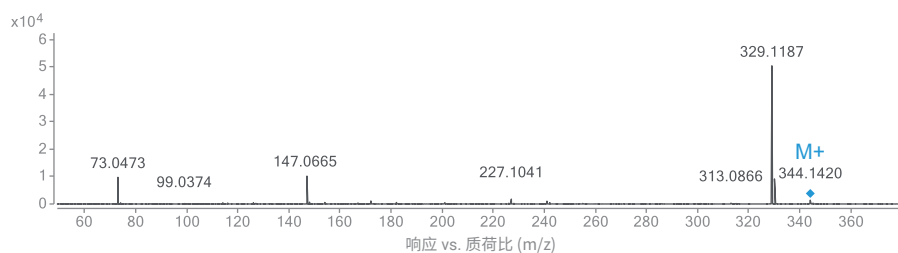


## 安捷伦保值承诺

安捷伦保证从购买之日起仪器至少有 10 年的使用寿命，或者当您选择将仪器升级到新型号时，我们将认可您原有仪器的剩余价值。

## 解析化学结构，揭示更详细的信息

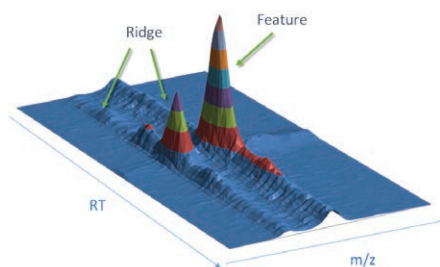
7250 GC/Q-TOF 是唯一具有 MS/MS 功能的精确质量飞行时间系统。分子结构关联软件 (MSC) 使用由推断分子离子所生成的 MS/MS 子离子谱图，可根据碎片数据提出化合物结构的概率和可能性。



有助于对未知组成或结构化合物的分析判断，缩小可能性范围。



# 寻求更好的定量和定性分析结果？



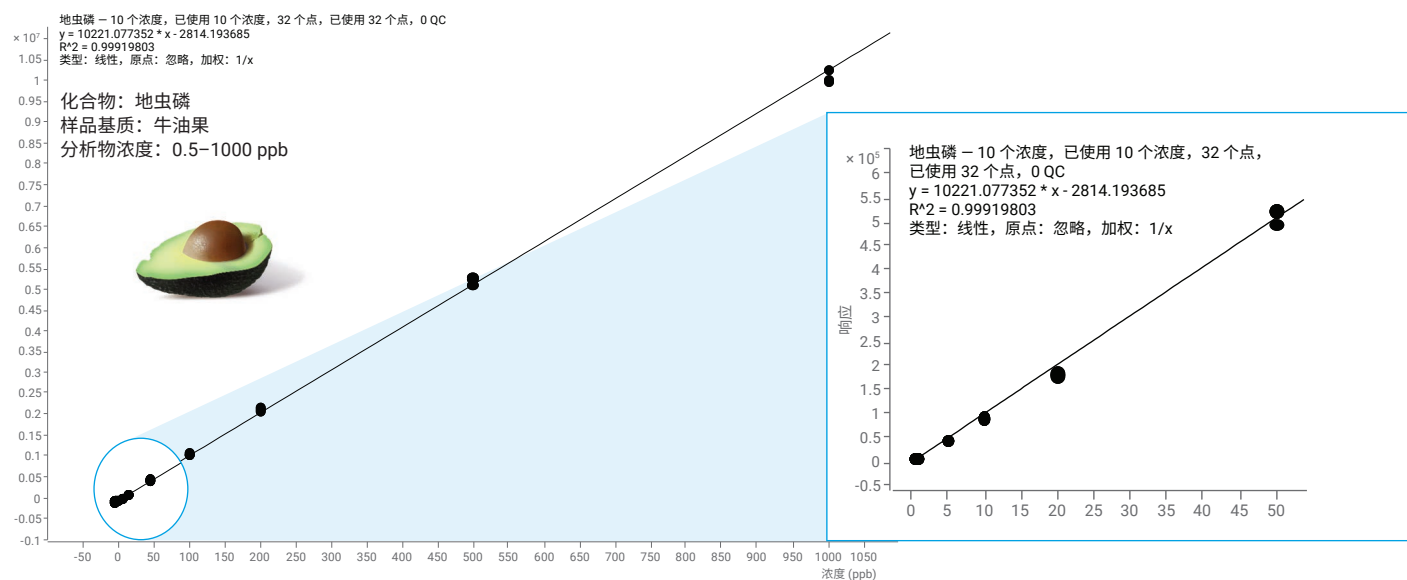
Agilent MassHunter SureMass 算法可检测化学特征，专门设计用于处理高分辨率质谱分析数据。

将非靶向采集和目标定量分析一起构成功能强大的组合。Agilent 7250 GC/Q-TOF 系统兼具高质量分辨率和宽动态范围，能提供无可比拟的定量准确度。此外，先进的电子元件能够实现宽线性范围和一致的响应，即使对于复杂基质中的痕量分析物也是如此。

SureMass 是一种独特的信号处理算法，针对高分辨率精确质量数据进行了优化，可进一步扩展线性动态范围。它也有助于在非靶向分析的色谱解卷积中实现优异的质量数准确度，同时提供更高的分析速度和灵敏度。

## 在复杂基质中实现准确的定量分析

宽线性动态范围能够准确定量各种浓度。即使复杂样品中的低浓度分析物也可获得稳定一致的响应因子，如牛油果基质中 0.5–1000 ppb 地虫磷的校准曲线所示。



# 利用替代软电离技术促进化合物鉴定

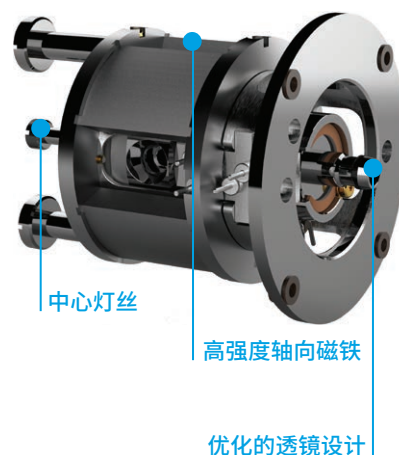
7250 是一款独特的高分辨 GC/Q-TOF，可实现以前难以实现或无法实现的工作流程。它让您能够不依赖于专门的技术即可获得离子碎片少的谱图，同时保持电子轰击电离 (EI) 的普遍适用性。

支持低能量 EI 离子源的 7250 以 Agilent 5977 GC/MSD 和 7010 GC/TQ 系统中经过验证的高效离子源 (HES) 为基础。不仅可以实现常规 70 eV 离子化，还针对低能量 EI 运行进行了优化。此外，对 HES 设计的改进扩大了低能量 EI 的分析灵敏度，实现了 GC/MS 软电离的重大革新。

7250 GC/Q-TOF 系统可选的软电离技术与支持 PCI 和 NCI 两者的可互换的化学电离源相结合，能够帮助您简化具有挑战性的分析工作。

- **可靠的鉴定。** 获取有关分子离子的信息，以便进行下游结构解析
- **突破限制。** 可实现对各类分析物的电离，同时避免其他软电离技术中常见的分析灵敏度的严重损失
- **提高效率。** 利用 GC/MS 先锋久经验证且性能出色的离子源技术

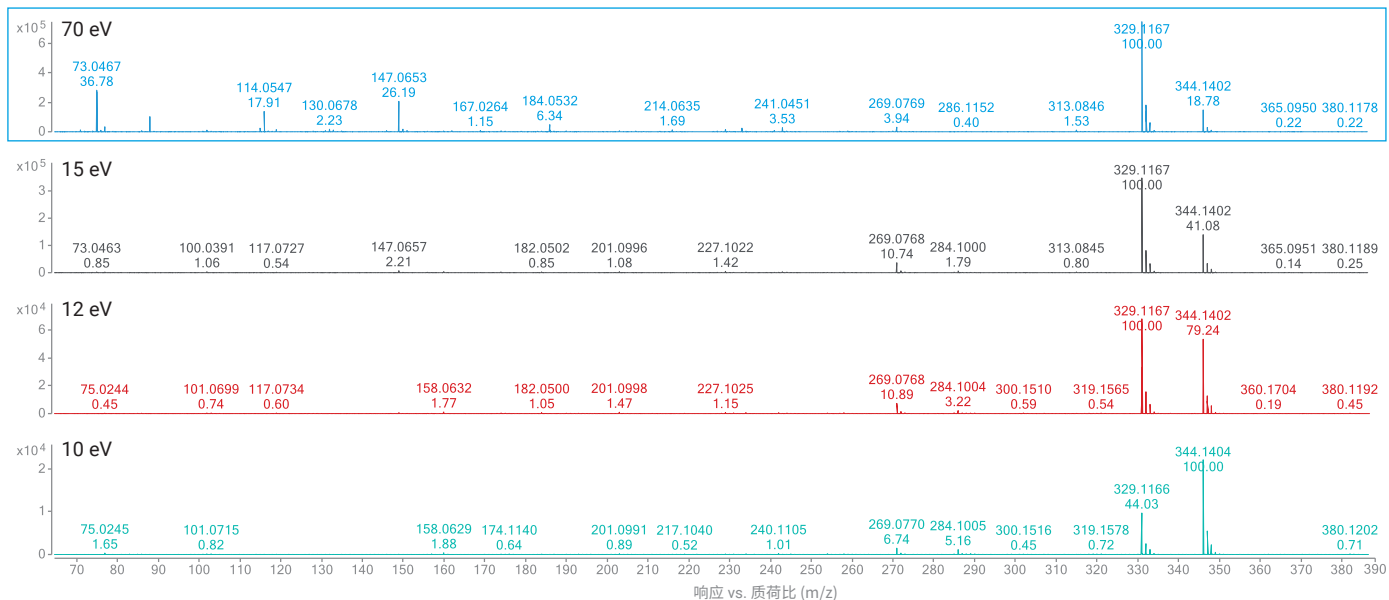
7250 低能量 EI 源



## 克服鉴定复杂基质中代谢物的挑战

降低离子源能量，能更容易获得分子离子谱图。此处，较低的能量对应于该未知化合物的分子离子的较高的相对丰度。

使用低电子能量鉴定分子离子



# 通过解决现实挑战来保护客户和您的声誉

食品生产者和消费者面临着掺假和标签虚假行为的威胁。此外，全球贸易、严格的法规以及公众意识的不断提高，促使需要更频繁、更详细的食品检测。

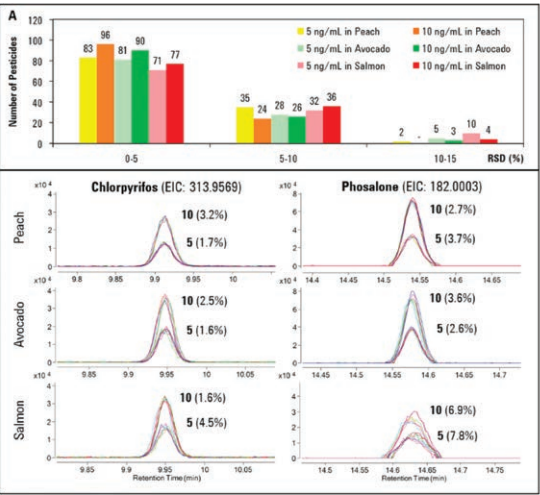
7250 GC/Q-TOF 系统助您通过单一平台轻松应对这些挑战。GC/Q-TOF 在食品检测领域的典型应用包括：

- 基于精确质量农药 PCDL 进行疑似物筛查和目标物定量
- 使用 SureMass 解卷积和广泛的单位质量 EI 谱库（如 NIST）进行非靶向筛查
- 用于掺假检测的食品分类

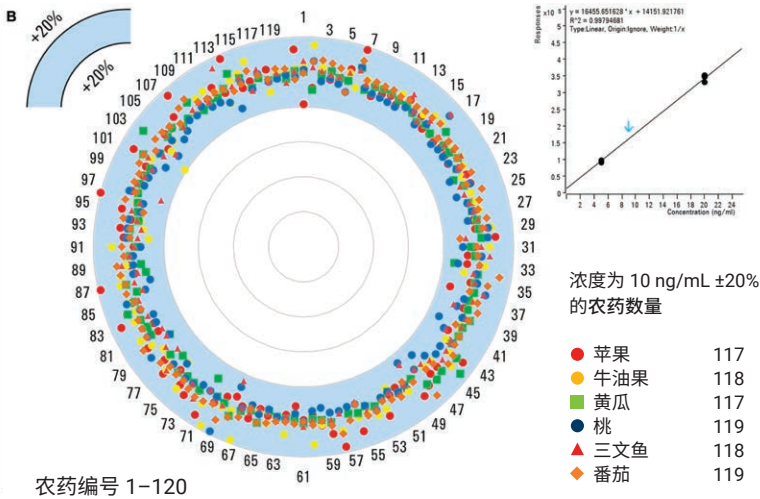


## 全面应对多样化基质

采用非靶向采集和精确质谱库，可对食品基质中的农药进行全面筛查。



将 120 种农药加标至三种不同食品基质（包括牛油果和三文鱼）中。加标浓度为 5 ng/mL 和 10 ng/mL 的重现性 (RSD%) 数值充分证实了优异的分析性能。还展示了两两种农药特征离子的重复测定谱图结果。



农药编号 1-120

10 ng/mL 下的定量准确度。以最大残留限量 (MRL) 为基准，展示了六种复杂程度不同的食品基质的定量准确度。即使对于牛油果和三文鱼等复杂基质，测试的农药/食品对中 97% 以上的定量准确度仍然能够满足 EU SANTE/11813/2017 指南的要求。

## 使用 GC/Q-TOF 疑似物筛查工作流程轻松识别假阳性

仅需一种分析方法，便可轻松评估大批量样品中的数百种目标化合物和疑似物。MassHunter 软件可实现对目标化合物的同步定量测定。它还可以让您在没有校准参考的情况下通过高分辨率谱库进行疑似物筛查。

使用一种数据分析工具同时进行目标和疑似物筛查

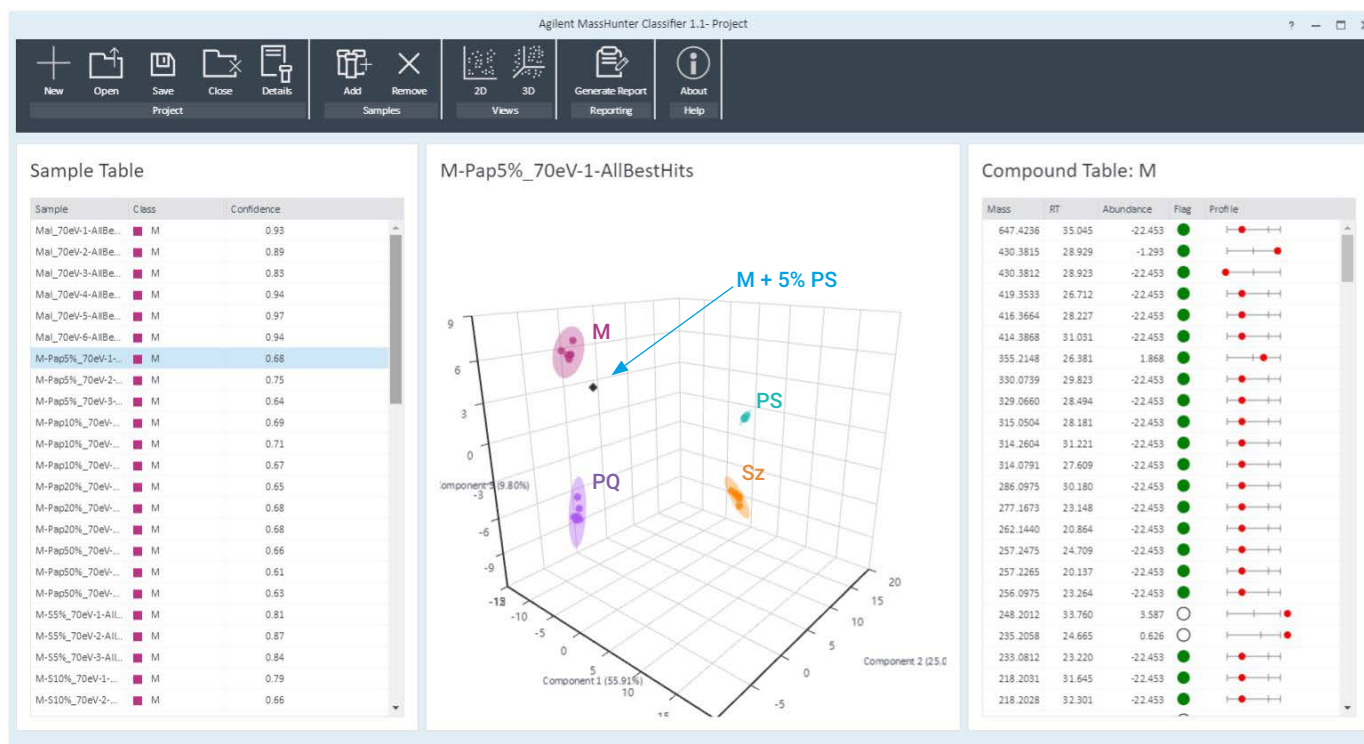


即便未运行标准品以供比较，也能够区分实际匹配结果与错误鉴定结果，这反映了 7250 GC/Q-TOF 系统的高分辨率和精确质量性能。

## 确认食品真伪并检测欺诈行为

食品欺诈是一个快速增长和变化的领域。飞行时间 (TOF) 与非靶向方法相结合，是一种快速兴起的用于检测食品欺诈和掺假的方法。为利用高分辨率 GC/Q-TOF 简化食品表征，可使用 Agilent Mass Profiler Professional (MPP) 软件创建分类模型，并使用 Agilent MassHunter Classifier 软件检测欺诈行为。

MassHunter Classifier 软件可视化工具包括化合物列表和三维 PCA 图



高分辨率精确质量 GC/Q-TOF 数据以及差异分析软件能够进行常规的食品样品筛查，以实现分类和食品欺诈检测。

Application Note  
Food Testing & Agriculture

Agilent  
Quality Solutions

Contaminants Screening Using  
High-Resolution GC/Q-TOF and an  
Expanded Accurate Mass Library  
of Pesticides and Environmental  
Pollutants

### 希望了解 Q-TOF 如何避免假阳性吗？

了解有关使用高分辨率 GC/Q-TOF 和精确质量谱库对草莓提取物中的农药和环境污染物进行筛选和定量的简化工作流程。[下载应用简报](#)

## 筛查已知污染物和鉴定未知物

每天都在出现关于人类对环境的影响以及环境对人类影响的新问题。Agilent 7250 GC/Q-TOF 系统中革命性的技术改进专为轻松高效地提供有意义的结果而设计。

使用精确质量高分辨率质谱 (HRMS) 技术表征已知和未知污染物的方法越来越受欢迎。为实现高灵敏度并扩大分析范围, 7250 可用于全面的工作流程中, 其中包括:

- 靶向定量分析
- 疑似物筛查
- 非靶向污染物筛查

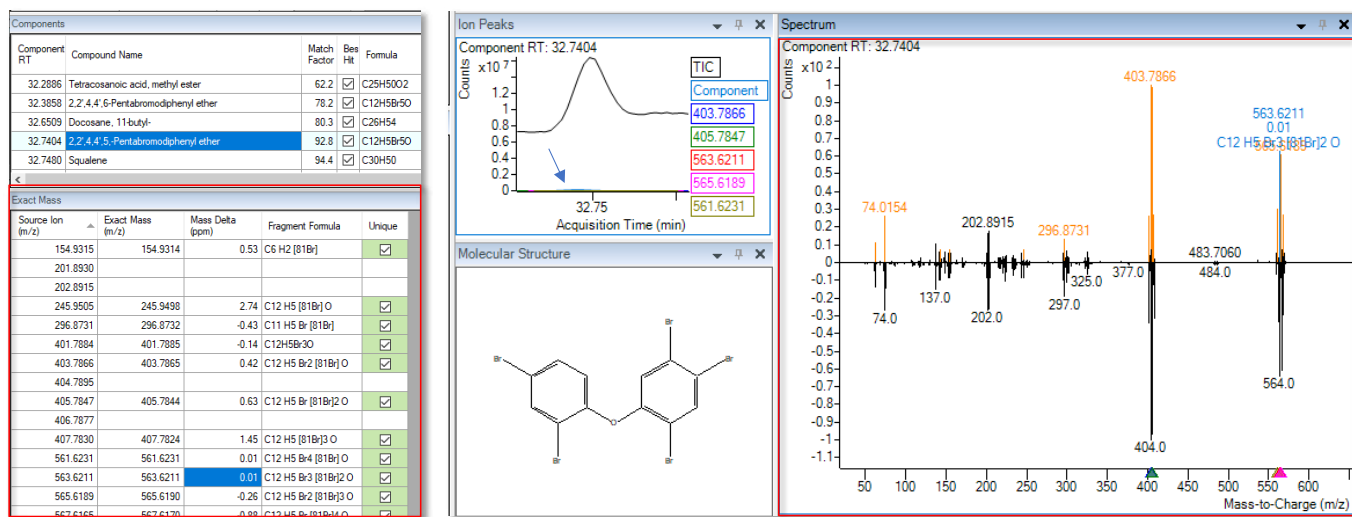
此外, 数据回溯处理让您能够只测量一次并用全谱数据反复处理数据, 可用于解析未来的新型目标物。



### 可靠的鉴定

MassHunter 未知物分析软件采用 SureMass 信号处理和 ExactMass 工具, 为您提供超越常规解卷积技术的分析效率和灵敏度。即使在强背景信号存在下, 微量组分同样可得到准确提取和鉴定。

ExactMass 功能可使用碎片分子式标注离子, 让您能够可靠地鉴定化合物, 即使使用四极杆质谱系统得到的标称质谱图的质谱库时, 也是如此。



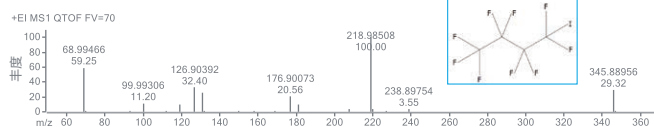
ExactMass 工具 (红色矩形) 有助于根据精确质量进一步确认单位质量谱库匹配结果。当  $m/z$  与谱库匹配结果的分子式相对应时, 镜像图中的代表性化合物离子将突出显示。蓝色箭头指向土壤基质中的解卷积组分。

## 用于环境样品中 PFAS 分析的精确质量谱库

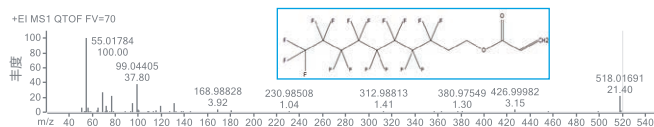
在环境应用中开发精确质量谱库是扩大监测的化合物范围并实现可靠的目标物/疑似物检测的关键。此外，它还有助于使用疑似物筛查方法，与非靶向筛查相比，靶向数据分析方法提供了更高的灵敏度和灵活性。

由 PFAS PCDL 得到的不同 PFAS 化合物类别的示例

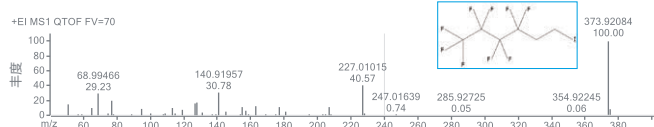
九氟-1-碘丁烷 (PFBI)



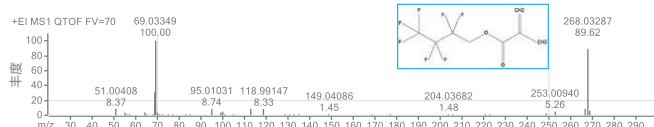
8:2 氟调聚丙烯酸酯 (8:2 FTAC)



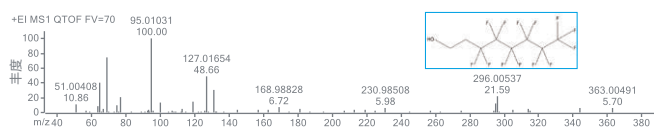
1,1,1,2,2,3,3,4,4-九氟-6-碘己烷 (6:2 FTI)



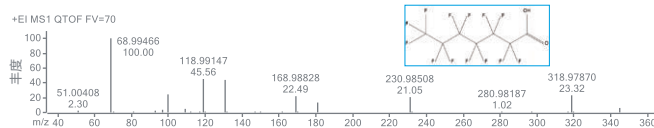
2,2,3,3,4,4,4-甲基丙烯酸七氟丁酯 (3:1 FTMAC)



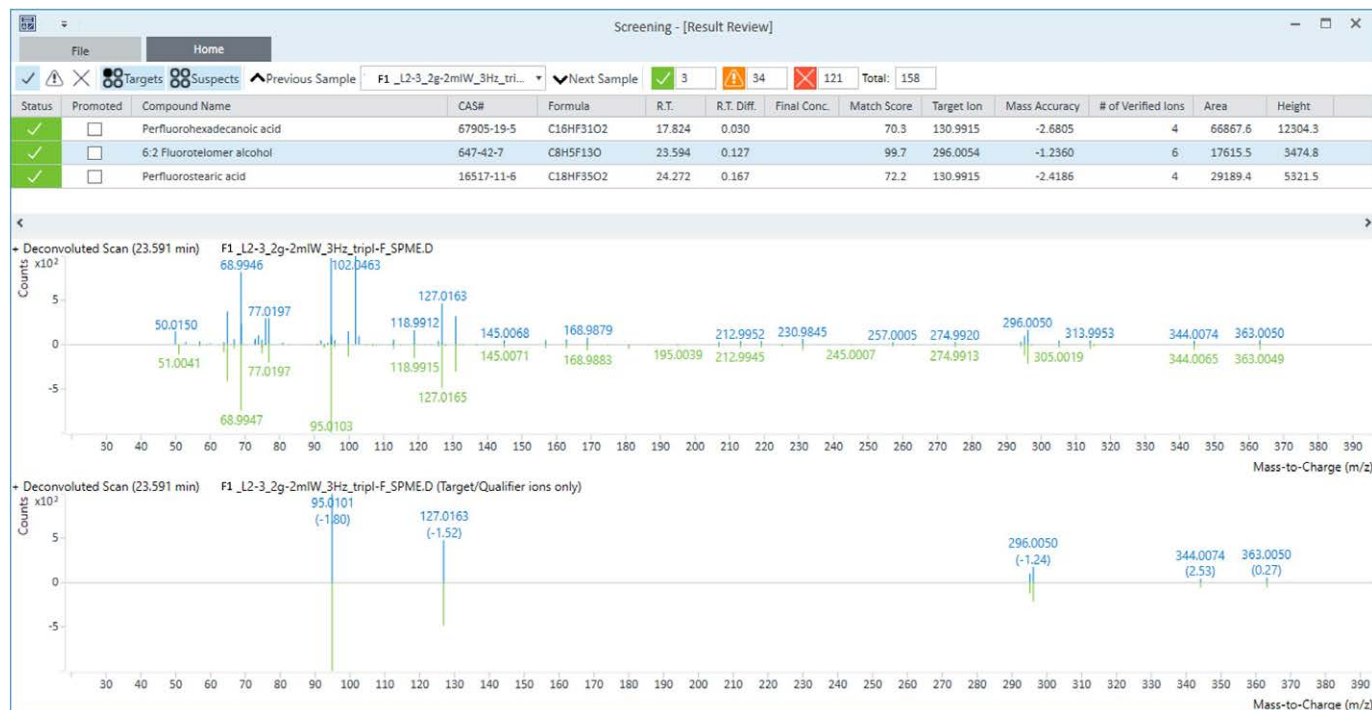
6:2 氟调聚醇 (6:2 FTOH)



全氟庚酸 (PFHpA)



使用 GC/Q-TOF Screener 和 PFAS PCDL 检测土壤中的氟调聚物醇



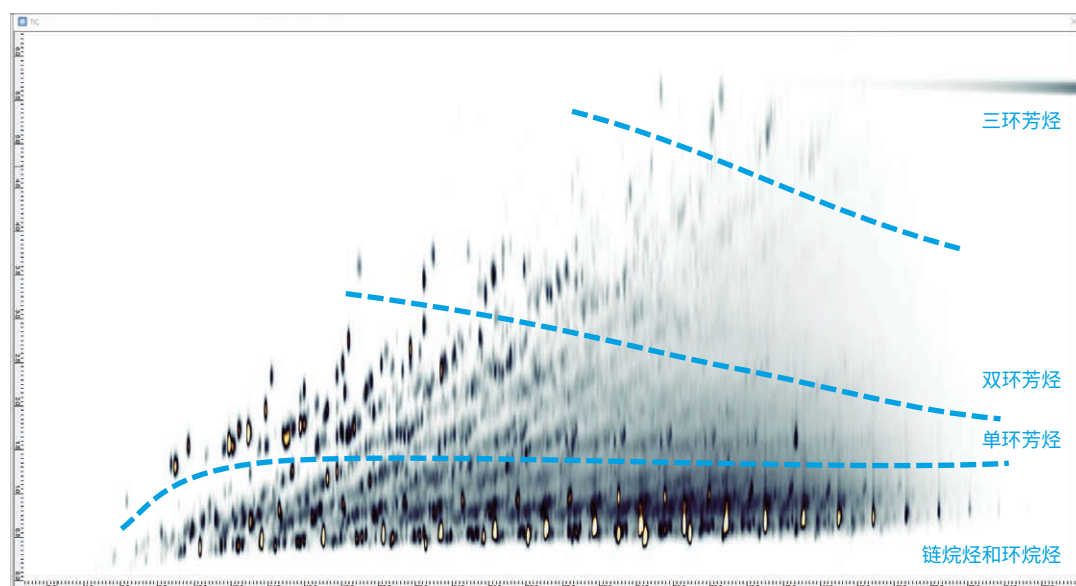
# 提高您的分析效率并确保产品质量

表征复杂样品中的分析物并不简单。它需要专业知识、洞察力和 Agilent 7250 GC/Q-TOF 系统具有的强大的分析能力，这些功能包括高分辨率精确质量数测量、可选的低能量电子和化学电离、可支持全二维气相色谱的快速谱图采集功能和高灵敏度 MS/MS 测量。

- 高达 50 Hz 的快速采集速率以及不受采集速率影响的分辨能力，使您能够表征窄色谱峰或超窄二维气相色谱峰
- 简化的谱图让您能够推导分子离子，因此您可以利用可选的 GC/MS 软电离技术
- 高分辨率精确质量离子谱图与强大的分子结构关联软件相结合，可提供化学结构的深度解析

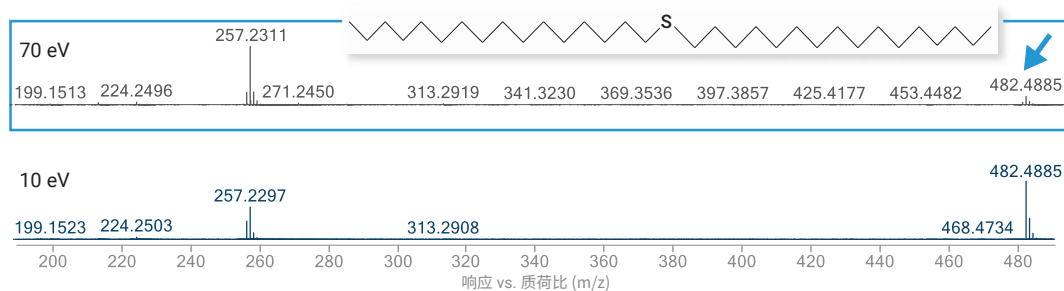


## 链烷烃和环烷烃



该图显示了安捷伦反向流路调制器如何帮助实现可靠的结果。全二维气相色谱图展示了柴油成分的准确分离。

## 十六烷基硫醚: $C_{32}H_{66}S$



采用革命性的低能量电子轰击电离源降低谱图复杂性，能够在得到分子离子增强的谱图时，尽可能地保持化合物的分析灵敏度。

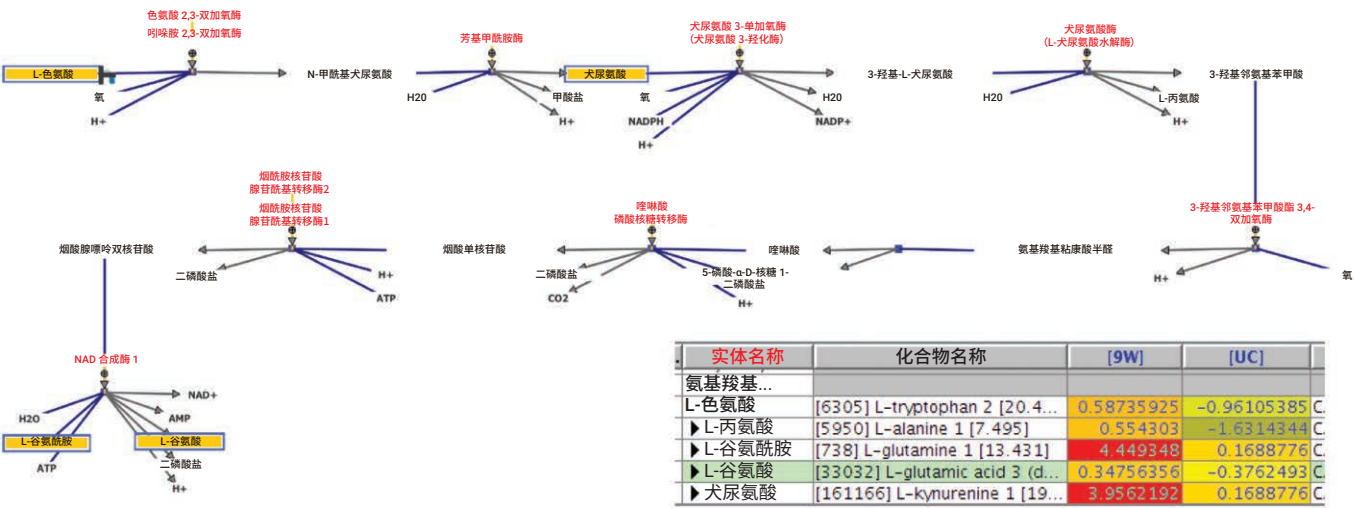
# 推动系统生物学研究

每天都会产生关于人类健康、诊断和疾病的新见解。推动这些进步的研究需要辛勤的实验设计和实践。利用 Agilent 7250 GC/Q-TOF 系统和软件生成的高分辨率数据推动您的研究进程。同时，它们能够帮助您鉴定生物基质中的更多化合物并揭示隐藏的趋势。

## 以通路为中心的代谢组学工作流程

复杂的代谢组学研究可充分利用 Agilent 7250 GC/Q-TOF 系统的全谱分析高灵敏度和精确质量数准确度，以及其 MS/MS 性能进行未知代谢物的结构解析。该系统扩展的动态范围允许对细胞中的代谢物同时进行准确的定量分析。

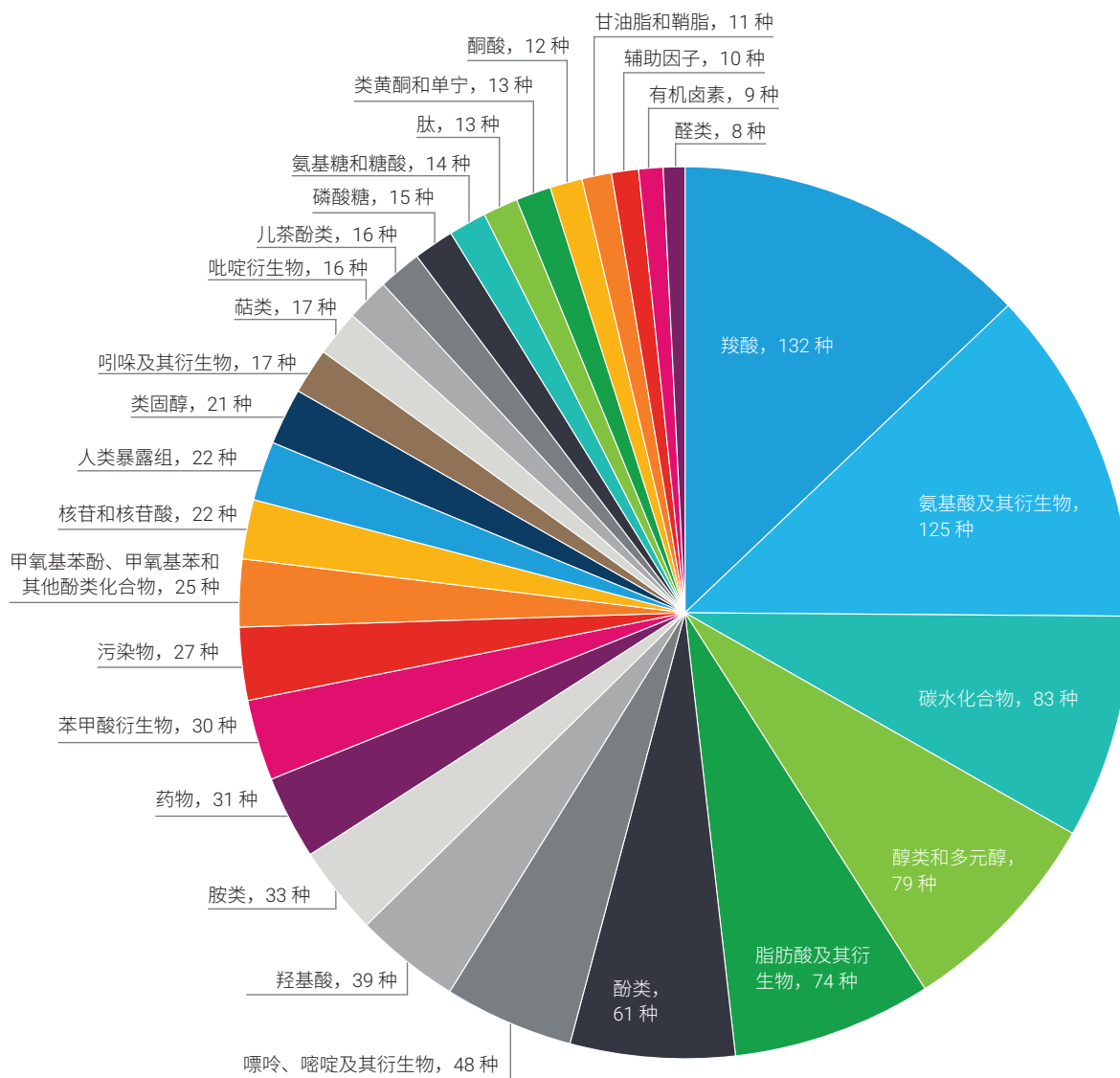
Mass Profiler Professional 配合 Pathway Architect 能够帮助解析质谱数据的生物学意义。利用 Pathway Architect，您可以从单“组学”或多“组学”实验中获得统计比较结果，并将结果映射到标准生物通路中。您还可以同时对通路信息进行分析、查看与解析。这一以通路为中心的工作流程加速了从发现、理解到验证的进程，并使您能够高效规划并执行后续实验。



Pathway Architect 结果示例：NAD 生物合成途径

## 利用精确质量代谢组学谱库和数据库简化代谢物鉴定

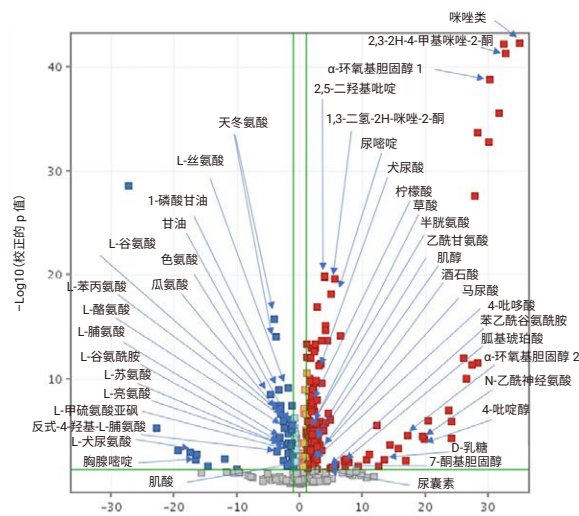
全新安捷伦 GC/Q-TOF 代谢组学个人化合物数据库与谱库 (PCDL) 是一款高分辨率谱库，包含 900 多种化合物，其涵盖了丰富的代谢物类别。



## 寻找您想要的答案

### Mass Profiler Professional 软件将复杂数据转化为清晰见解

样品组之间的差异分析将重点放在执行比较研究时具有统计学意义的对象。在本例中，我们鉴定出健康个体与心力衰竭受试者之间的代谢物差异。结果通过火山图上的倍数变化分析呈现，轻松实现了可视化。



“将高分辨率 Q-TOF MS 与 Mass Profiler 软件相结合，我们就可以分析出不同基质中与目标农药共洗脱的组分。”

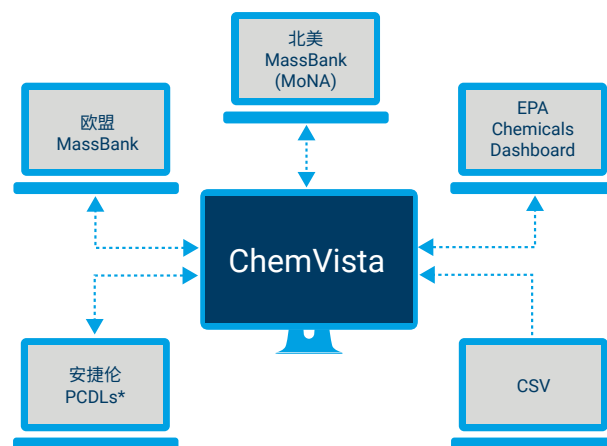
— Carmen Ferrer 博士  
阿尔梅里亚大学分析系

### 包含丰富全面的集成谱库的 Agilent ChemVista 软件

Agilent ChemVista 是一款独立的软件应用程序，用于管理通过 LC/Q-TOF 和 GC/Q-TOF 质谱创建的谱库。它将来自多个质谱库的化合物详细信息、保留时间和谱图信息整合在一起，让您们可以：

- 访问多个公共数据库和精心优化的谱库
- 整理、管理、编辑或创建谱图
- 在 MassHunter 数据分析等应用程序中轻松实施鉴定工作流程
- 更可靠地鉴定化合物

此外，ChemVista 还包括广泛的预加载谱库和数据库内容。



\*经过优化的个人化合物数据库与谱库



CrossLab 代表了安捷伦集服务、消耗品和实验室资源管理于一体的独特解决方案，能帮助实验室提高效率、优化操作、延长仪器正常运行时间，并提升用户技能等。我们独特的服务确保您的仪器时刻以理想性能运行，涵盖技术更新、应用咨询、维修、预防性维护、法规认证和培训。

Agilent CrossLab 为安捷伦和特定的非安捷伦仪器提供支持，并为实验室提供工作流程搭建、实验室业务咨询和合规性、库存管理和资产管理（包括移机服务）等咨询服务。

[了解更多关于 Agilent CrossLab 的信息](#)以及洞察敏锐、成就超群的示例。

如需了解更多信息，请访问：

[www.agilent.com/chem/gcms-qtof](http://www.agilent.com/chem/gcms-qtof)

查找当地的安捷伦客户中心：

[www.agilent.com/chem/contactus-cn](http://www.agilent.com/chem/contactus-cn)

安捷伦客户服务中心：

**免费专线：800-820-3278**

**400-820-3278（手机用户）**

联系我们：

[LSCA-China\\_800@agilent.com](mailto:LSCA-China_800@agilent.com)

在线询价：

[www.agilent.com/chem/erfq-cn](http://www.agilent.com/chem/erfq-cn)

仅供科研使用。不用于临床诊断用途。

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

RA45442.6111111

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2024  
2024 年 6 月 5 日，中国出版  
5991-8109ZHCN

